

Доказательства регионального замещения F-7 атома получены при исследовании ^1H , ^{19}F и ^{13}C ЯМР спектров соединений **IIa** и **IIIa**. В ^{13}C ЯМР спектре соединения **IIa** сигналы узловых атомов C-4a и C-8a представляют собой дублеты дублетов вследствие взаимодействия с двумя атомами фтора через три и четыре связи: δ_{C} 136.32 м.д. ($J_{\text{CF}} = 10.3, 1.9$ Гц) и δ_{C} 129.31 м.д. ($J_{\text{CF}} = 10.5, 1.5$ Гц). При замещении одного из атомов фтора мультиплетность узловых углеродов C-4a и C-8a изменяется до дублетов и только для одного из них сохраняется константа $^3J_{\text{CF}} \geq 10$ Гц. Кроме того углерод C-4a ($\delta_{\text{C}} = 134.02$ м.д.) дает в спектре НМВС для **IIIa** кросс-пик с протоном Н-3 ($\delta_{\text{H}} = 10.09$ м.д.), что возможно только для 7-замещенного производного.

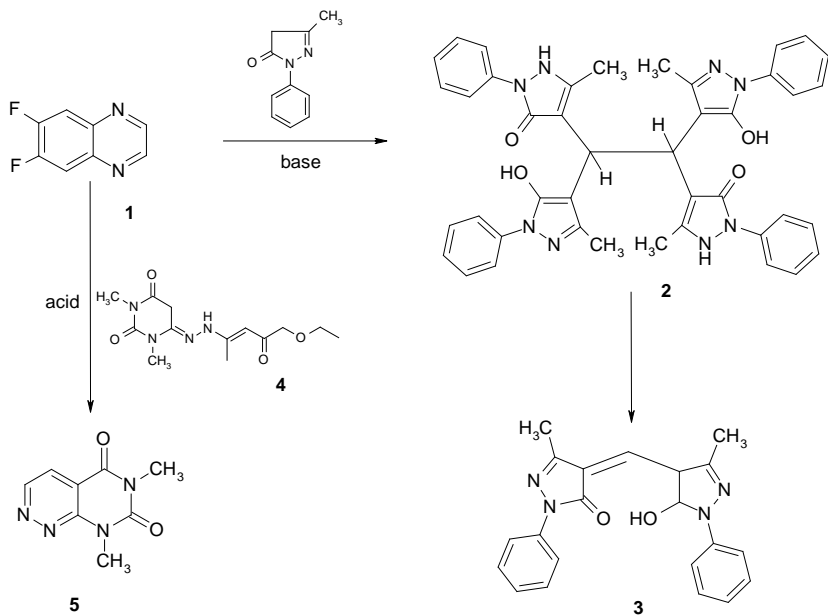
В результате проведенных исследований предложен простой путь синтеза 2-замещенных хиноксалинов, содержащих в ароматическом ядре фармакофорные фрагменты присущие для антибиотиков фторхинолонового ряда.

6,7-ДИФТОРХИНОКСАЛИН КАК ДОНОР УГЛЕРОДНЫХ ФРАГМЕНТОВ В РЕАКЦИЯХ С НУКЛЕОФИЛАМИ

Ермакова О.С., Азев Ю.А., Ковалев И.С.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Взаимодействием 6,7-дифторхиноксалина **1** с избытком 1-фенил-3-метилпиразолона-5 в присутствии основания получен 1,1,2,2-тетра-(5-метил-3-оксо-2-фенил-1,2-дигидро-3Н-пиразол-4-ил)этан **2**. При нагревании **2** в растворе диметилформамида до 150° образуется известный дипиразолилметан **3**.



В результате реакции хиноксалина **1** с гидразоном **4** в присутствии кислоты в кипящем этаноле получен 6,8-диметилпиримидо-[4,5-с]-пиридазино-5,7(6Н,8Н)-дион (**5**).

Строение продуктов **2**, **3** и **5** подтверждено данными ^1H ЯМР спектроскопии и масс-спектроскопии. Исследованы масс-спектры для производного тетрапирозолилэтана **2**. Зарегистрирован масс-спектрометрический распад ионов с водородной перегруппировкой Мак-Лафферти.

Обсуждаются механизмы обнаруженных химических трансформаций.